

 Inhalt archiviert am 2024-05-30

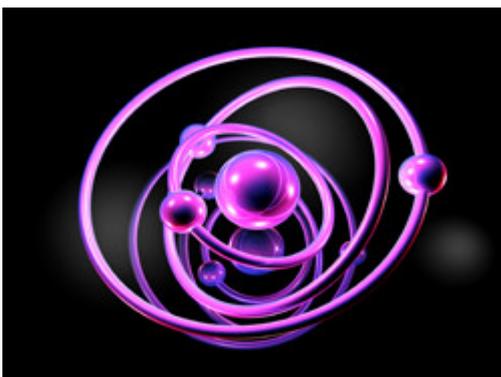


Quantum-mechanical simulations for the nanoscale

Ergebnisse in Kürze

Computersoftware auf Basis der Quantentheorie

Dank der effektiven Zusammenarbeit zwischen der Industrie und der akademischen Welt im Rahmen einer EU-Initiative erfuhr kommerziell verfügbare Quanten-Modellierungssoftware in Europa einen Aufschwung.



© Thinkstock

Wissenschaftler wenden die Quantentheorie täglich an, um das Verhalten von Computerbauteilen, Lasern, Chemikalien und Nanomaterialien aller Art zu verstehen und vorherzusagen. Jedoch wurde erst vor Kurzem möglich, die Quantenmechanik auf die rechnergestützte Materialwissenschaft anzuwenden, in der regelmäßig Systeme aus zehntausenden oder mehr Atomen behandelt werden.

Im EU-finanzierten Projekt QUASINANO (Quantum-mechanical simulations for the nanoscale) kamen die Industrie und die akademische Welt zusammen, um innovative Verfahren auf Basis der Quantentheorie zu entwickeln, welche Materialmodelle simulieren, die im Nanomaßstab 10.000 Atome enthalten.

Ein parameterbasiertes approximales Verfahren der Dichtefunktionaltheorie (dichtefunktionalbasierte enge Bindung) wurde eingesetzt, um den größten Teil des

Periodensystems abzudecken und durch Verbesserung der Elektronendichte genauere Informationen zur elektronischen Struktur und den spektroskopischen Eigenschaften zu liefern. Universalparameter zur Messung elektronischer Bandstrukturen wurden erzeugt und validiert. Hochmoderne mathematische Tools zur Optimierung der Parameter und Berechnung der Repulsionsenergie wurden ebenso geprüft und implementiert. So wurde es erstmals möglich, mithilfe dieser hocheffizienten Technik jedes beliebige Material zu behandeln.

Des Weiteren wurden die Methode in kommerzielle ADF-Software integriert und ermöglicht dort die Behandlung von Molekülen, Oberflächen, Feststoffen und jedem anderen nanostrukturierten System. Softwareentwicklungen, die auf bestehenden ADF-Funktionen aufbauen, wurden durchgeführt. Die Methoden und die Software wurden in die bestehende ADF-Softwaresuite eines kleinen bis mittleren Unternehmens eingegliedert und bei herausfordernden nanowissenschaftlichen Umwelthanwendungen eingesetzt.

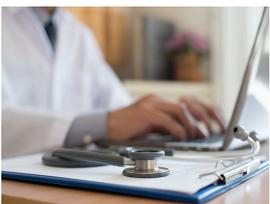
Zur Verbreitung der Projektergebnisse wurden zwei internationale Workshops in Deutschland und den Niederlanden abgehalten. Etwa 50 wissenschaftliche Arbeiten wurden in expertengeprüften Fachzeitschriften veröffentlicht.

Durch das QUASINANO-Projekt wurden Wettbewerbsfähigkeit und Marktposition der quantentheoriebasierten Computersoftware in Europa verbessert. Die ADF-Modellierungssuite wird Wissenschaftlern nun ermöglichen, die herausforderndsten Forschungsfragen der rechnergestützten Materialwissenschaft wirksamer in Angriff zu nehmen.

Schlüsselbegriffe

Quant, Computersoftware, Materialwissenschaft, quantenmechanische Simulationen, Dichtefunktionaltheorie

Entdecken Sie Artikel in demselben Anwendungsbereich



[Cloud-basierte Echtzeit-Überwachung lässt Herzen höher schlagen](#)





Digitalisierung des stationären Einzelhandels



Modellbasierter Rahmen mit KI-unterstützter Automatisierung für cyber-physische Systeme



Hightech- und Altdaten ermöglichen neue Ansätze für die Exploration tiefliegender Bodenschätze



Projektinformationen

QUASINANO

ID Finanzhilfevereinbarung: 251149

Projekt abgeschlossen

Startdatum

1 Oktober 2010

Enddatum

30 September 2014

Finanziert unter

Specific programme "People" implementing the Seventh Framework Programme of the European Community for research, technological development and demonstration activities (2007 to 2013)

Gesamtkosten

€ 769 672,00

EU-Beitrag

€ 769 672,00

Koordiniert durch
SOFTWARE FOR CHEMISTRY &
MATERIALS BV
 Netherlands

Letzte Aktualisierung: 30 September 2015

Permalink: <https://cordis.europa.eu/article/id/91949-eu-competitiveness-in-quantum-theorybased-computer-software/de>

European Union, 2025